

Autonomous Non-Profit Organization for Higher Education
Skolkovo Institute of Science and Technology

Russian Federation, 143025, Moscow Region, Odintsovsky District, Skolkovo, Novaya St. 100

Primary State Registration Number (OGRN): 1115000005922
Taxpayer Identification Number (INN): 5032998454 Tax Registration Reason Code (KPP): 503201001
Telephone +7 495 280 1481
<http://uspex-team.org>
E-mail: a.oganov@skoltech.ru

ОТЗЫВ НАУЧНОГО КОНСУЛЬТАНТА

о диссертационной работе Квашнина Александра Геннадьевича «Компьютерный дизайн новых функциональных и конструкционных материалов с заданными физико-химическими свойствами для целенаправленного синтеза», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа Квашнина А.Г. посвящена прогнозированию кристаллической структуры новых функциональных и конструкционных материалов с заданными физическими и физико-химическими свойствами на основе боридов, карбидов и нитридов переходных металлов, а также гидридов различных элементов под давлением посредством использования методов компьютерного материаловедения. Кроме того, важной частью диссертационного исследования является построение закономерностей, связывающих структуру новых материалов с их свойствами.

Данная проблема является актуальной как с фундаментальной, так и с практической точки зрения. Сверхтвёрдые материалы активно используются в добывающей, обрабатывающей, оборонной промышленности и поиск и разработка материалов обладающих улучшенными механическими характеристиками по сравнению с традиционно используемыми материалами приведет к производству более эффективного оборудования на их основе. В области сверхпроводящих материалов с настоящее время серьезным вызовом является поиск соединений, обладающих сверхпроводимостью при комнатной температуре. Решение этих задач и поиск новых соединений, способных заменить традиционные материалы является важной и актуальной

задачей особенно в контексте конкурентоспособности нашей страны на международном рынке.

Одним из важных результатов работы является предсказание нового соединения – пентаборида вольфрама, обладающего уникальным сочетанием твёрдости и трещиностойкости. Основываясь на теоретических данных был проведен экспериментальный синтез этого материала для дальнейшего его использования вместо твердого сплава в добывающей промышленности. На основе экспериментальных и теоретических данных было показано, что синтезированные материал имеет разупорядоченную структуру и состав WB_{5-x} , и была разработана модель, позволяющая определить наиболее выгодную локальную структуру этого соединения. Проведённые исследования позволили построить карту распределения твёрдых и сверхтвёрдых материалов, учитывающая такие свойства как твёрдость по Виккерсу и трещиностойкость. Построенная карта позволяет эффективно определять наиболее перспективные соединения для последующего целенаправленного синтеза, исследования и применения в промышленности.

Область высокотемпературной сверхпроводимости получило новое активное развитие с 2014 года, когда был предсказан гидрид серы с рекордной на тот момент критической температурой. В 2017 году был предсказан декагидрид лантана, который побил рекорд с $T_C \sim 250$ К. Позже теоретические предсказания были подтверждены рядом экспериментов, что несомненно говорит о важности роли компьютерного предсказания в поиске новых материалов, в том числе сверхпроводящих.

Основными и наиболее важными результатами диссертационной работы Квашнина А. Г. является компьютерное предсказание кристаллической структуры и исследование физических свойств потенциальных сверхпроводящих гидридов тория в диапазоне давлений до 200 ГПа. Теоретические исследования позволили предсказать структуру декагидрида тория, который стабилизируется уже при давлении 80 ГПа, что значительно ниже давления стабилизации супергидридов других элементов. Результаты этих исследований привели к целенаправленному синтезу высших гидридов тория в алмазных камерах высокого давления. Объединение данных о сверхпроводящих свойствах предсказанных и синтезированных в данной работе, а также сторонних данных позволило разработать правила распределения сверхпроводящих гидридов по Периодической системе химических элементов им. Д.И. Менделеева. Полученные правила служат ориентиром для экспериментаторов, планирующих осуществлять дальнейшие исследования в данной области.

За время работы над диссертацией Квашнин А. Г. проявил себя учёным высокого уровня, обладающим большой инициативой, работоспособностью и заинтересованностью в проводимых исследованиях, о чем говорит список из 60 опубликованных им статей (14 из которых вошли в диссертацию) в ведущих мировых реферируемых научных журналах. Среди них такие авторитетные и высокорейтинговые журналы, как Materials Today, Journal of American Physical Society, Journal of Physical Chemistry Letters, Advanced Science, Physical Review B и др. Результаты диссертационной работы докладывались на 25 крупнейших международных и российских конференциях.

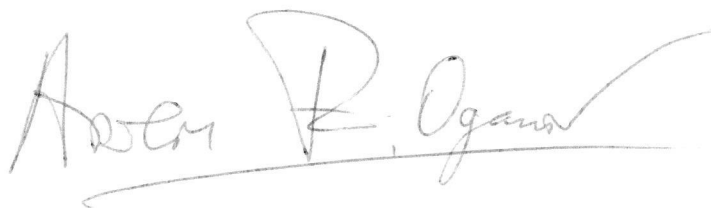
Во время работы в лаборатории Квашнин А. Г. руководил грантами Российского научного фонда, Российского фонда фундаментальных исследований и Фонда содействия инновациям УМНИК.

Диссертация Квашнина А. Г. написана хорошим профессиональным языком, с подробным литературным обзором и анализом современного состояния исследований по рассмотренным проблемам. Считаю, что результаты, описанные в диссертации, вносят весомый вклад в современное материаловедение. Диссертация Квашнина А. Г. полностью соответствует всем требованиям, предъявляемым Положением ВАК РФ к докторским диссертациям, а её автор, безусловно, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Научный консультант

Профессор, доктор физ.-мат. наук

Оганов Артем Ромаевич



Профессор, заведующий лабораторией,

Сколковский институт науки и технологий

121205, Москва, Большой бульвар д.30, стр.1.

Тел: +7-909-940-80-21

Email: A.Oganov@skoltech.ru

Москва, 28 августа 2020

Подпись Оганова А.Р. утверждено
Руководитель отдела
Кадрового администрирования
Г. С. С.
28.08.2020

